「非周期系物性の基礎理論」

（1968年度　第2回）

標記の研究会が9月16日～18日 御車会館で行われた。統計力学国際会議の後を承け，外人学者数名を招待し，3日2晩起居を共にして，活溌な意見の交換を計ろうと云う試みで，国内参加者はすべて公募とした。

出席者：　E. Montroll (Rochester), P. Dean (National Physical Laboratory), J. Des Cloizeaux (Saclay), R. T. Rubin (National Bureau of Standards), W. M. Visscher (Las Alamos), A. Scotti (C. C. R. Euratom),
堀（北大理），斉藤，宮田，広岡（早大理工），戸田，小寺（教育大理），塚田，福山，斉藤（東大理），張（物性研），小口（都立大理），柏村（名大教養），金吉（名大理），松原，中沢，石井（京大理），米沢，松田（基研），植山（阪大教養）。

スケジュールは第1日目は主としてグリーン関数法による研究発表，第2日目は主としてphonon system に関するもの，第3日目は相変化とmagnon systemの問題を取上げた。国際会議直後のことで参加者に多少の疲れの色が見られたが，種々興味深い話題もあって有意義であった。以下は座長にお願いして書いて頂いた研究会報告である。

世話人：　堀淳一，戸田盛和，松原武生，松田博嗣

（文責　松田）

9月16日　午前　（小寺）

始めに戸田（東教大）が三日間の予定，国際会議のあとという機会を利用して外人を交えてゆっくり討論することの意義，日本における研究者の興味をもつ主題，研究や発表の態度などについて話し，挨拶を行った。

ついでMontroll（Rochester）が不純物を含む格子系について一般的なintroductory な話をした。物理的な考察を広い観点から進め，数式に移っても絶えず，物理的な観点を失わないで議論を進める態度は印象的であった。研究者がともすると数式のdetailに心をうばわれて広い観点を失うおそれがあるのが馬鹿らしく思えてくる。

Montroll 氏は先づ戸田氏の話（日本における研究）にふれ，彼の所にN. I. H.（not invented here）と云う項目があって，その方の研究がむしろ進んで居ると云う様な話があり，一般に他で先鞭をつけた研究の方が客観的判断が出来てその後の研究は進むのではないかと述べられた。

次に，格子系の一般論に入り，格子系の問題には，先づ1次元，2次元，3次元と云う様に，次元の問題がある事，又一方，それぞれに格子振動の問題，電子状態の問題，random walkの問題があり，特にrandom walkの問題を次元の問題とからませ，capturing points（impuritiesに対応）のある場合について論じ，再帰確率の問題に還元され，1次元，2次元（再帰確率が1）と3次元（再帰確率は1より小）は本質的異って居る事を述べた（J. Keller Am. Math. Soc. App. Math. Symp.（1960，1964）），更に新しい問題としてD. N. A. の問題もあるがその点は9月18日に述べると云って，今日はふれないと云う事であった。

9月16日　午後　（松原武生）

第1日目の午後は「グリーン関数法」にあてられた。参加外人の中でdes Cloizeauxを除いて，強い関心があるとは思われなかったが，次のようなプログラムで進行した。

(1) Yonezawa：Introductory talk on the Green's function method

(2) Ueyama：Application of Kubo's generalized cumulant expansion to random lattice problem

(3) Tsukada：Cell method to random lattice problem

(4) Fukuyama： Impurity band conduction
Saito

まずYonezawa はこのinformal meetingの意義を説明し，特に

(i) 研究グループが大きく
Pro－Green's function group
Con－Green's function group
に分かれて，互いに他のグループの立場を理解しようとしない傾向を是正すべきだということ。

(ii) 日本の業績，特に若い研究者の寄与が外国で無視されたり，正しく評価されない傾向があるので，このような機会に接触を深め，情報交換を十分にして改善すべきであること。

を最初に強調した。そして非周期系の問題にグリーン関数を応用する研究が我が国でどのような経過をたどって発展し，現在までにどのような成果を挙げてきたかを明快な英語で説明した。この歴史的展望は要領よくまとめられ，相当説得力があった。グリーン関数法の長所と短所から説きおこし，最大の短所と言われる系統的近似法が確立されていない欠点をなくす努力がどのようになされてきたかを説明した。 例えばYonezawa の最近の仕事である" self－contained approximation "は高次に進むことによって今までグリーン関数法で導けなかったフォノンスペクトルの微細構造を出せる可能性があること等，スライドを用いて示された。

座長はこのIntroductory talk に対するコメントをすべての外人に求めた。これに対して，Pro－ar Con－Green's function の二つのグループに分かれているのは世界各国共通の現象であることが注意され，Montrollはグリーン関数法特にグラフ展開法の欠点として，他の方法で手速く得られることが大変" slow " にしか得られないこと，グラフ法に多種多様があって混乱していること等あげた。将来標準的教課書が出て統一されることが望ましいという意見である。また" non－scientific " な問題としてYonezawa が提起した" 我が国の研究者の寄与の無視…… " について一言ふれ，「若い人の研究が無視される傾向にあるのは日本人だからというのではない。それはアメリカ国内でもその傾向があって，P. R. のための直接講演をしてまわるのでな

ければ容易に認めてもらえない。日本は更に条件を悪くしているのは事実であるが，立派な仕事，重大な発見は数年遅れても認められるだろう。この点で，プログレスのサプリメントで日本の仕事を紹介するのは有意義である」という旨の意見を述べた。

DeanはYonezawa があげたグリーン関数法の長所に多少疑義をはさみ，数値計算その他で得られたことしか追試できない欠点を指摘した。そして例えばガラス物質の振動をグリーン関数で扱えるだろうかと問いかけた。Visscher はグリーン関数法を用いて数値計算しなくても電子計算機を用いて直接有用な結果が得られるではないかという意味のことを述べたが，これに対してはDeanが電子計算機では数値は出ても一体何がおこっているかについての洞察は得られないと半ばグリーン関数法を援護するようなことを述べた。Montroll はグラフ法ではじめて有用な結論が得られた例として電子ガスのスクリーニングの問題その他を挙げた。Tòdaはグリーン関数法とは何をさすのか疑問を投げかけた。この研究会にEdwards の参加が期待され，結局実現しなかったが，Edwards がもしいたらグリーン関数を"unavoidable" と言って弁護したかも知れない。Pro－grupとCon－group の溝は世界的にも深いものである。

UeyamaはKuboのgeneralized cumulant expansion を使って，グリーン関数のクラスター展開を直接導く試みを紹介した。これに関連してdes Clozeaux は自分の仕事にふれ，問題の難しい点を注意して，非周期系の問題でパラメータとして何をとるべきかよくわからないと述べた。Montrollはこれを受けて同じ困難が例えばDNAのdenaturationの問題でランダム配置を考慮するときおこることを指摘した。

Tsukada はスペクトルのクラスターによる微細構造を導く近道としてグリーン関数のCell 法を提案した。一次元についての数値計算の結果はこの方法の有用さを示している。Visscher はどのような微細構造が得られるかは最初に選んだCellの大きさに依存することをコメントした。

Saito は電子ガス＋short range potentialの系に磁場を加えたときの状態密度，帯磁率，易動度，ホール係数，磁気抵抗等を不純物ポテンシァルの密度の関数として得た結果を多数のスライドを用いて示した。

Matsuda はこの結果の一部，特に低密度の極限について異なる意見をもつことを述べ，Matsubara は水素原子型ポテンシャルの場合の計算の結果は多少異なることをコメントした。

最後にFukuyama はWada Ebisawa 等との共同研究についてふれ，磁場内での不規則系の電子状態，および輸送係数の一般論から導かれるホール係数の特徴を紹介した。

9月17日　午前　（堀　淳一）

Informal Meeting の第2日はdisordered system におけるphonon の問題が主題にとりあげられ，午前中にDean，Visscher 及びRubin の3氏の話があった。Dean の話はNational Physical Laboratory のBell と彼自身によって定式化された，最近接相互作用をもつある種の格子の振動スペクトル及び固有モードがもつ対称性の理論の紹介であった。これはかなり広範囲の格子（disordered latticeも含む）においてω^2 のスペクトルが対称になり，且つ互に対称な位置にある固有モードの間に簡単な関係があることを，振動を記述するdynamical matrix の数学的な性質に基づいて一般的に示したもので，美しい結果であり，また具体的な格子における実例は興味深いものである。また実際のスペクトルの非対称性から次近接相互作用の大きさをestimateするなどの実際的な応用の可能性もある。これに対してMontroll，Oguchi などから質問があり，若干の討論が行われた。

Rubin はさきに6月の第1回研究会において筆者が紹介したdisordered lattice 中の波の伝播の理論を簡潔にのべ，phase の変化の数値計算によって追跡した結果をスライドによって示した。前回の報告でものべたように，Rubin の理論は固有モードの局在化の問題とも密接に関連して，本質的な意味をもつものと思われるが，数値計算も見事なもので，次のVisscher の映画と共に数値実験のもつ説得力を強く印象づけた。Rubin の話に対しては，Mazur，Montroll，Matsuda，Nakazawa，Dean，Toda，Kashiwamura などから質問があり，活潑な議論が行われた。

Visscher はまずKubo の公式によって1次元の同位原子無秩序格子の熱

伝導率が記述されるかどうかという問題について話をし，Mazur，Montroll，Toda，Matsuda などとの間で討論が行われた。Visscher は昨年の固体内の局在励起の国際会議で，2次元の無秩序格子の波の伝播を数値的に計算し，それをdisplay した映画を発表したが，この話のあとでそれが再上映された。この仕事はrandomness が存在する場合には，非調和性があるときの方がないときよりも波のwave front がよく保存され，従って熱伝導がよくなることを示した点で重要であり，またこの映画は重い不純物原子のところに現われるspikeをvivid に示していて甚だ興味深いものである。上映後このフィルムを日本のrandom system のグループに寄付したいという彼の申し出をありがたく受け入れ，基研で保管して今後に役立てることになった。

国際交流が盛になったといっても，この種の会合を開いてみると，依然としてlanguage barrierが厳存しており，日本人側からの発言がとかく制約されがちになるという感じをぬぐうことができなかったが，random system におけるphononの問題という比較的concentrate されたテーマについて，国外の代表的な研究者から集中的に話をきき，且つ討論することができたことは非常に有益であったと思う。このような機会が将来再びもてることを期待しつつ筆をおく次第である。

（1968.11.11.記）

9月17日　午后　（戸田）

松田（京大基研）がいくつかの話をした。

(1) AB_xC_{1-x} 型のmixed crystal のband gap の話。

(2) coarse grained quantities の話。この話でGreen 関数のcomplex argument の関数形から考えられるweight のとり方でなくてもよいではないかという注意が誰かからなされた。例えばgauss 型のweight functionで平均値を求めることも考えてよいだろうというのである。一考の価値がある注意であった。

(3) localization of eigen-functions 不均一の質量分布をもつ一次元結晶で波の右からの透過を考えると，振幅は $e^{\alpha n}$ の形で減衰する。ここに

$$\alpha = \frac{<(\Delta m)^2>}{8<m>K}\omega^2$$

（Kはバネ常数）。質量mの分散が大きいほど減衰ははげしい。この問題はRubin の計算の一般化である。

(4) thermal conduction 調和振子からなる一次元結晶で，eigenfunction は(3)によりある点の両側に振幅が減衰し，localize する。これはVisscher が数値的に示したところと一致する。その振幅が格子の両端に達するところから熱振動のエネルギーが出入り出来ると考えると，heat flow は

$$Q = \frac{c<m>}{\sqrt{<(\Delta m)^2>}}\ \frac{\Delta T}{\sqrt{N}}$$

となる（cはある常数）。$Q = K\frac{\Delta T}{N}$と書くと熱伝導度に相当するには格子の長さの平方根（$K \infty \sqrt{N}$）に比例することになる。また1方の質量をm，不純物の質量をm（<1）とするとKが最小になる不純物の割合いが

$$P_{min} = \frac{1}{1+m}$$

となる。これはVisscher の数値計算とよく一致しているように思われる。

ついで堀（北大理）は不規則鎖の固有関数の局在性に関する計算機による研究を紹介し，斉藤・広岡（早大理工）は非調和格子の振動におけるエネルギー分配の計算機実験の結果と，非調和力の存在のために一次元不規則鎖の振動の局在性がどのような影響を受けるかについての試みを話した。

9月18日　午前　（斉藤信彦）

Montroll：DNAのmelting の統計理論

DNAの塩基配列は試料によってきまった一定のものであって，このような非周期系の分配関数を計算して，必要な物理量を計算するのが目的である。た

とえばＤＮＡの溶液の温度を上げて行くと，二重らせんのＤＮＡがほどけて２本のランダムな分子になる。このような現象をmelting というと，melting をおこす温度は，塩基の組成によってちがうことが知られている。この種の問題から，melting の現象を解析することによって，塩基の組成や，配列がわかれば，生物学的にも重要である。

ＤＮＡの塩基対はＡＴ又はＧＣの２種である。２番目の塩基対の状態を σ_j で表わし，それが結合しているか，はなれているかに従って

$$\sigma_j = \begin{cases} 1 & \text{結合しているとき} \\ -1 & \text{はなれているとき} \end{cases}$$

とすれば，Ising モデルのように，１と－１の２つの量で状態を記述することが出来る。２種類の塩基対を１，２であらわし，その配列が与えられたときの分配関数として，たとえばその配列が（２１１２……）であれば

$$Z = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \cdots = \pm 1} \exp\left[-\{ J_2\sigma_1 + J_1\sigma_2 + J_1\sigma_3 + J_2\sigma_4 + \cdots \} + U(\sigma_1\sigma_2 + \sigma_2\sigma_3 + \sigma_3\sigma_4 + \cdots) \right]$$

を考える。ここでＵは隣接する塩基対のエネルギーの相関をあらわすもので，Ｊのサフィックスの１，２は塩基対の種類をあらわし，σ のサフィックスは配列の順序をあらわす。

塩基対が一種類であったり，周期的であったりすれば問題は比較的容易であるが，その配列が非周期的な与えられたものであるとき，Ｚをいかに計算するかがＤＮＡの問題である。

マトリックスの固有値 λ と固有ベクトルを使って

$$e^{-\frac{1}{2}J_1(\sigma_1+\sigma_2)} e^{U\sigma_1\sigma_2} = \sum_j \lambda_j \phi_j(\sigma_1)\phi_j(\sigma_2)$$

$$\sum_{\sigma_2} e^{-\frac{1}{2}J_1(\sigma_1+\sigma_2)} e^{U\sigma_1\sigma_2} e^{-\frac{1}{2}J_1(\sigma_2+\sigma_3)} e^{U(\sigma_2\sigma_3)}$$
$$= \sum \lambda_j^2 \phi_j(\sigma_1)\phi_j(\sigma_3)$$

等の関係をつかうことによりＺをかき直し，環状のＤＮＡに対し，

$$Z = \sum \cdots\cdots\sum \lambda_{j_1}^{n_1}\ \lambda_{j_2}^{n_2} \cdots \quad (j_1 j_2)(j_2 j_3)\cdots \quad (j_n j_1)$$
$$j_1,\ j_2, \cdots = 1,\ 2$$
$$(j,\ k) = \sum_{\sigma} \varphi_j(\sigma) e^{-(J_2 - J_1)\sigma} \varphi_k(\sigma)$$

とかいて，この展開式を考える。Montroll は各項の係数に関するrecurrence relationを導いて，それを数値的にとく方法を示した。非周期性物性の研究に計算機の利用が有効であることを示す一つの例であった。

小口：Localized Magnons in a Ferromagnet Heisenberg 模型のFerromagnetic chainの中に1コスピンの大きさと交換積分の異なる不純物スピンが入ったとき，そこに局在したスピン波が生ずるが，これについてくわしく論じた。

金吉敬人：ランダムな配列をもった結晶の誘電率の問題；結晶格子の上に，nonpolarな分子がランダムに配置しているとき，その誘電率を米沢，松原の方法でしらべた。双格子相互作用のテンソルをG_{ij}とすると，i，j は，無極性分子の存在する結晶の格子点をあらわす。i 分子に誘起されるモーメントはEを外からの電場とすると，

$$m_i = \{ \alpha + \alpha^2 \sum_{\{j\}} G_{ij} + \alpha^3 \sum_{\{j\cdot k\}} G_{ij} G_{jk} + \cdots \quad \} E_0$$

とかけるが，逆格子ベクトルqをつかって

$$G_{ij} = \frac{1}{v} \sum_q \lambda(q) e^{iqr_{ij}}$$

と展開すると，分極Pは次のように表わされる。

$$\frac{P}{E_0} = N_i \left(\frac{\alpha}{v}\right) + \left(\frac{\alpha}{v}\right)^2 \sum_{q_1} \lambda(q_1) p(q_1) p(-q_1)$$
$$+ \left(\frac{\alpha}{v}\right)^3 \sum_{q_1} \sum_{q_2} \lambda(q_1)\lambda(q_2) p(q_1) p(q_2 - q_1) p(-q_2) + \cdots$$

但し
$$p(q) = \sum_{\{i\}} \exp(iq\cdot r_i)$$

N_i は無極性分子の数である。この式を，分子の可能な配列のすべてについて平均する必要があるが，これをダイアグラムの方法で行い，Clausius-Mossotti の式との比較を行った。